

# トリプチセン分子膜における光吸収と偏光依存性に関する理論的研究

著者	秋田 将志
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10236/00028851">http://hdl.handle.net/10236/00028851</a>

## トリプチセン分子膜における光吸収と偏光依存性に関する理論的研究

関西学院大学大学院理工学研究科

物理学専攻 若林研究室 秋田 将志

一原子層の炭素原子膜であるグラフェンの発見以降、原子膜物質の探索は活発に行われている。最近では、有機分子を人工的に二次元重合した分子膜物質が設計されている。これは共有結合有機構造体 (COF) と呼ばれる材料で、自然界には存在しないネットワークを実現できる。また、COF は形状や性質の制御が容易で、かつ不燃性の固体材料であるため今後の材料応用に関しても期待を集めている。

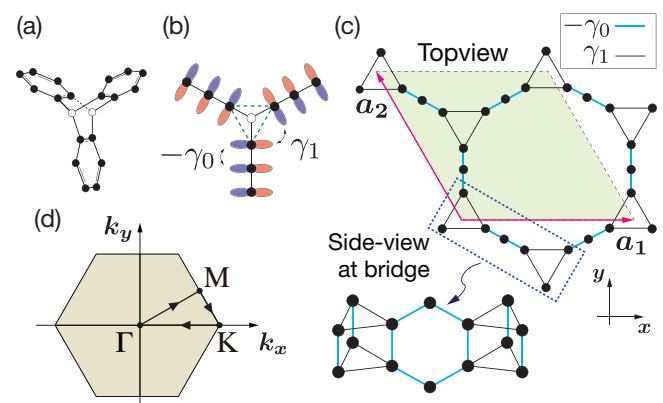


図 1. (a) トリプチセン分子の構造. (b) トリプチセンにおける  $sp^2$  炭素原子が構成する  $\pi$  電子のネットワーク.  $-\gamma_0, \gamma_1$  は原子間の飛び移り積分を表す. (c) zigzagTMM の格子構造. 緑で塗られた領域は単位胞を示す. (d) zigzagTMM の 1st BZ.

COF の一つに、トリプチセン分子を人工的に二次元重合したトリプチセン分子膜 (TMM) がある。トリプチセン分子は図 1(a) に示すようにプロペラ型の芳香族炭化水素分子である。黒サイトと白サイトはそれぞれ  $sp^2$  炭素原子と  $sp^3$  炭素原子を表す。トリプチセンにおける  $sp^2$  炭素原子に着目すると、プロペラ部分のベンゼン環同士で結合が生じる。そのため、トリプチセン内の  $\pi$  電子は図 1(b) 中の緑の点線で示した三角格子のネットワークを構成する。

TMM は重合時の架橋構造によって zigzag 型と armchair 型の二種類に分類される。トリプチセンの二次元重合時には六員環を構築するため、TMM における  $\pi$  電子は三角格子と六角格子から構築されるカゴメ格子を形成する。図 1(c) に zigzag 型 TMM の格子構造及び架橋構造の詳細を示す。zigzag 型 TMM における単位胞は緑で塗られた領域となるので、第一ブリルアンゾーン (1st BZ) は図 1(d) に示すように六角形の領域となる。TMM の電子状態は密度汎関数理論 (DFT) によって、熱力学的に安定した半導体物質であることが示されている [1, 2]。特に、TMM における  $\pi$  電子はカゴメ格子のネットワーク起因による特異な光学特性を持つことが期待される。しかしながら、DFT による光物性の解析には多くの計算コストを必要とする。したがって、本研究では Tight-binding model (TBM) によって DFT 計算における TMM の電子状態を再現し、光学特性の理論的な解析を行った。

図 2(a) は zigzag 型 TMM のエネルギーバンド構造である。黒実線と青実線で示したバンドはそれぞれ層間における結合状態及び反結合状態を示す。xy 偏光によってこれらの二つの状態間の遷移は禁制である。したがって、図 2(a) に示すような結合状態間の  $T_1, T_2, T_3$  遷移に着目をする。

TMM の光吸収強度は線形応答理論に基づく久保公式を用いて計算した。特に、TMM では円偏光 (左回り: LCP, 右回り: RCP) 照射に対して特定の運動量を持つ電子の選択的な励起が起きる [3]。1st BZ 内の互いに非等価な  $K$  点をそれぞれ、 $K_1, K_2$  点と呼ぶと、 $K_2$  点を含む領域内における  $T_1, T_2, T_3$  遷移による円偏光吸収スペクトルは図 2(b) に示すように、LCP 及び RCP で吸収強度に差が生じる。特に、 $T_1$  遷移では、図 2(c) の波数空間における吸収強度のマッピングが示すように LCP(RCP) によって  $K_1(K_2)$  点近傍の電子を選択的に励起する。この性質は、armchair 型 TMM でも同様である。

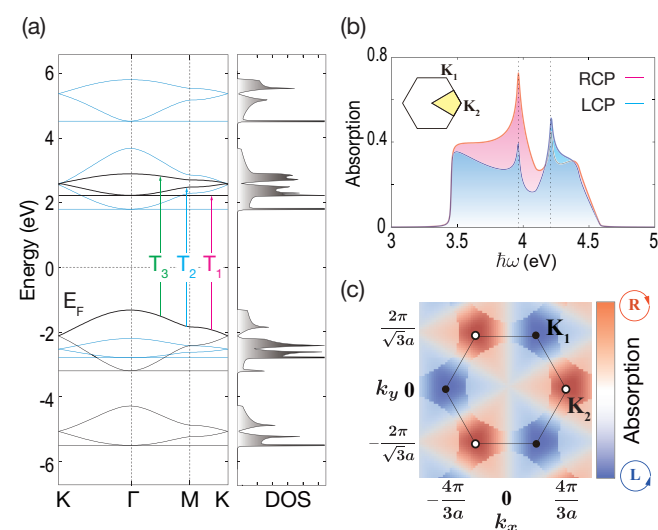


図 2. (a) zigzagTMM におけるエネルギーバンド構造と状態密度. (b)  $K_2$  点を含む領域内における zigzagTMM の円偏光吸収スペクトル. (c)  $T_1$  遷移における波数空間上の吸収スペクトルのマッピング. 青 (赤) 色の領域は LCP(RCP) に対して励起する運動量を示す.

本研究では、TMM に関する光学特性を理論的に解析した。DFT によるエネルギーバンド構造の特徴を忠実に捉えた TBM を構築することで、TMM の偏光依存特性と光学遷移選択則を明らかにした。特に、円偏光照射によって、TMM における各  $K$  点近傍の電子は選択的に励起される。したがって、本研究によって TMM の光制御デバイスへの応用可能性を理論的に示した。

## Reference

- [1] Y. Fujii, M. Maruyama, K. Wakabayashi, K. Nakada, and S. Okada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, Vol. **87**, No. 3, p. 034704, (2018)
- [2] Y. Fujii, M. Maruyama, and S. Okada, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. **57**, p. 125203, (2018)
- [3] M. Akita, Y. Fujii, M. Maruyama, and S. Okada, K. Wakabayashi, *Phys. Rev. B*, (2020) (In press)